

FDPS を用いた Janus 粒子の MD シミュレーション

野村 昂太郎

第 1 章

概要

本文書では，FDPS をもちいて実装された Janus 粒子の分子動力学シミュレーションプログラムに関し，使用方法や実装中に気づいた点について記述する．FDPS に関する説明は FDPS のマニュアルを参照されたし．

第 2 章

使用方法

2.0.1 コンパイル

本プログラムは、以下の環境でコンパイルできることが確認されている。

- g++ 4.9.0

c++11 がコンパイル可能な環境ならば大丈夫だと思われる。src ディレクトリに移動後、付属の Makefile により make コマンドでコンパイルが実行できる。デフォルトの実行ファイル名は janus.out となっている。

2.0.2 オプション

本節ではコンパイル時に指定できるオプションを紹介する。

-DPARTICLE_SIMULATOR_THREAD_PARALLEL

OpenMP を用いて並列で計算を実行するためのオプション。コンパイラに適した OpenMP 用のオプションを適宜追加する必要がある (gcc ならば -fopenmp)。

-DPARTICLE_SIMULATOR_MPI_PARALLEL

MPI を用いて並列化するためのオプション。コンパイラを mpi 版のものに変更する必要がある。

-DNOSE_HOOVER

温度制御を追加するためのオプション。このオプションを有効にすると NVT アンサンブル (になっている保証はない) で実行することができる。熱浴の質量に当たる値 Q は、プログラム内でグローバルな定数として与えられている。この値の大きさによっては計算が正しく実行できない場合がある。計算が破綻する場合には、 Q の値を 10 倍してみることをおすすめする。

2.0.3 実行条件の変更方法

janus.cpp の最初の方に，実行時に与えることのできないシミュレーション条件をグローバル変数として並べてある．主要なものを以下に説明する．Soft Matter 論文の 1 から 3 パッチの場合の変数は，ソースコードに例として与えてある．

パッチの数 (Npatch)

パッチの数を指定する．現状，複数種類の Janus 粒子を取り扱うことはできない．

各パッチのベクトル (patch)

各パッチの方向を示すベクトルを (x,y,z) の PS::F64vec 型の配列として宣言する．Npatch の数だけベクトルを宣言できる．

coef_r

斥力のパラメータ α^R .

coef_a

引力のパラメータ α^A .

coef_v

$f(n_i, n_j, r_{ij})$ の指数 ν .

tm

各パッチの角度のカットオフ距離 θ_m [rad].

solvent_ratio

溶媒 (斥力のみ働く粒子) の割合 ([0.0,1.0]) . FCC の座標を生成する場合，ランダムに溶媒が選ばれる．

2.1 実行方法

2.1.1 実行時オプション

本節では実行時に指定できるオプションを紹介する．デフォルト値については-h オプションを参照のこと．

-N [number of particle]

粒子数を指定する．初期条件として FCC に並べているため，現状 $4 \times n^3$ (ただし n は自然数) しか指定できない．

-d [density]

数密度を指定する．

-T [density]

温度を無次元数で指定する．

-s [number of steps]

ステップ数を指定する．

-S [number of steps]

何ステップごとにスナップショットを書き出すか，インターバルを指定する．

-D [number of steps]

何ステップごとにポテンシャルエネルギー，運動エネルギー，熱浴のエネルギー，全エネルギーなどを書き出すか指定する．

-e [number of steps]

何ステップ平衡化計算を行うか指定する．平衡化計算中は毎ステップ速度スケーリングによって速度が補正される．

-o [name of directory]

出力されるデータを置くディレクトリーを指定する．実行時にそのディレクトリがない場合は生成される．デフォルトは「./result」

-o [name of directory]

入力の座標ファイル (CDV 形式) を指定する (未実装)．

-t [time]

無次元時間で時間刻みを指定する． $1e-4$ 以下を推奨．

-n [number of group]

n_group_limit の値を指定する．実行速度に関係する場合がある．基本的には指定不要．

第 3 章

気づいた点

3.1 ポテンシャルエネルギーと力，トルクに関する考察

$\theta_m = \pi/2$ 以外の場合， $f^{v-1}(n_i, n_j, r_{ij})$ が $\pi\theta/2\theta_m = \pi/2$ で連続でない (しかもその差が巨大な) ため回転運動を入れた場合，全エネルギーが保存しない．